

УДК 548.1:548.71

АЛГОРИТМ ВЫДЕЛЕНИЯ ПОДРЕШЕТОК В КРИСТАЛЛАХ ПРОИЗВОЛЬНОЙ СИНГОНИИ*А. В. Силинин, Р. И. Филиппов*

Работа поддержана Фондом содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере по программе «У.М.Н.И.К.» (государственный контракт №5442p/7961).

Как известно, кристалл можно представить в виде совокупности решеток Браве одного типа. Такие решетки в научной литературе носят название подрешеток кристалла. Очевидно, что если рассматривать данное определение, то количество подрешеток будет равно количеству трансляционно-неэквивалентных атомов в примитивной ячейке. Понятие «подрешетки» можно расширить: подрешеткой кристалла можно считать любую совокупность атомов одного сорта, которые будут образовывать произвольную решетку Браве. Кристалл в таком случае может состоять из подрешеток разного типа симметрии и центровки. Иногда оказывается, что в кристалле можно выделить подрешетку с симметрией более высокой, чем у основной решетки Браве кристаллической структуры. Наличие таких подрешеток может проявляться в некоторых физических свойствах кристаллов [1-3].

При обработке большого количества кристаллографических данных возникает проблема автоматизации процесса декомпозиции кристаллов на подрешетки. В настоящее время авторами ведется разработка программного комплекса «SubFinder» для выделения высокосимметричных подрешеток в сложных кристаллических соединениях и их визуализации в прямом и обратном кристаллических пространствах. Приведем основные моменты и особенности разработанного алгоритма для выделения подрешеток.

За основу возьмем примитивную ячейку (ячейку с минимально возможным количеством атомов). Не будем вдаваться в подробности получения и минимизации ячейки. Здесь под минимизацией ячейки понимается получение примитивной ячейки из произвольной. В алгоритме выделения подрешеток есть несколько моментов:

1. Первым делом производится элементарное действие по разделению атомов на подмножества, в каждом из которых содержатся только атомы одинакового сорта (одного и того же химического элемента). Пример для двумерного пространства приведен на рис. 1.

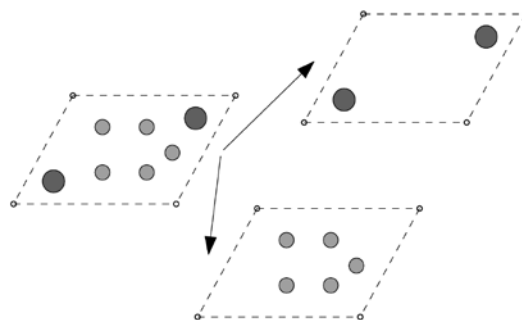


Рис. 1. Разделение атомов элементарной ячейки на подмножества атомов разных сортов

2. Далее производится работа с каждой из групп сортов по очереди. Смысл алгоритма состоит в переборе разных подмножеств атомов в выбранном сорте. Каждое из подмножеств образует новый базис в элементарной ячейке, всегда меньший по количеству атомов, чем исходный.

Элементарная ячейка транслируется на те же основные векторы трансляций, что и у кристалла. Новый уменьшенный базис в элементарной ячейке может транслироваться так, что все атомы будут попадать в узлы некоторой решетки Браве. Это и проверяется для каждого из подмножеств в выбранном сорте. Но перед тем, как перейти к этой части алгоритма, более подробно остановимся на переборе различных подмножеств атомов. Если перебирать все возможные, то для N атомов получим 2^N возможных комбинаций. Можно для ускорения работы программы существенно сократить это количество, если учесть тот факт, что в предполагаемом образующем подрешетку базисе атомы уже должны находиться в узлах этой же решетки. Другими словами, в части подрешетки, которая «вырезается» исходной элементарной ячейкой кристалла, атомы не могут располагаться произвольно.

Достаточно четырех атомов, чтобы задать трансляции в предполагаемой подрешетке. Поэтому реально нужно перебрать только возможные подмножества, состоящие из четырех атомов. Для N атомов получим верхнюю оценку для количества возможных комбинаций вида N^4 .

Соответственно поступают следующим образом: выбирают 4 различных атома так, чтобы три вектора, которые начинаются на первом из них и оканчиваются на трех оставшихся, были некомпланарными. Далее для каждого атома из того сорта, с которым работает алгоритм, проверяется, попадает ли он на какой-либо из узлов решетки, образованной вышеуказанной тройкой векторов. Если нет, то он не берется в подмножество, которое будет проверяться на 3 шаге алгоритма. В качестве примера

на рис. 2 приведен пример перебора подмножеств атомов для сорта в плоской решетке. Перечеркнутый атом не берется в результирующий базис.

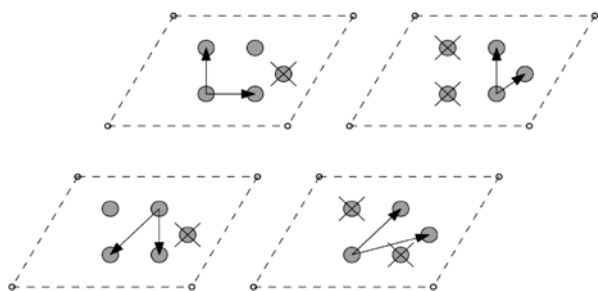


Рис. 2. Перебор подмножеств атомов для сорта в плоской решетке

Рассмотрим, что нужно сделать для проверки принадлежности атома некоторому узлу решетки Браве. Заметим, что координаты в произвольном репере $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ связаны с декартовыми следующим соотношением: $\vec{r} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$. Или, если записать в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix},$$

где (n_1, n_2, n_3) – вектор в косоугольной системе координат. Как видно, для получения компонент вектора $\vec{n}$ необходимо найти обратную матрицу A^{-1} : $\vec{n} = A^{-1} \vec{r}$. Принадлежность узлу определяется по целочисленности координат вектора $\vec{n}$.

3. После выбора нового базиса в элементарной ячейке его нужно проверить на способность образовывать подрешетку. Воспользуемся тем свойством, что в решетке Браве все атомы являются трансляционно-эквивалентными. То есть окружение одного атома полностью идентично окружению другого. Осталось это проверить для каждой пары атомов. Делается это следующим образом: к элементарной ячейке с новым базисом достраиваются такие же элементарные ячейки, которые граничат с исходной хотя бы в одной точке. В трехмерном пространстве нужно будет достроить 26 ячеек. Далее выбирается пара атомов, которую необходимо проверить и строится вектор, который начинается на одном из них и заканчивается на другом. После этого все атомы из центральной элементарной ячейки, вокруг которой были достроены дополнительные, транслируются на полученный вектор. Если каждый из них совместится с каким-либо из атомов во всех 27 ячейках, то исходная пара атомов считается трансляционно-эквивалентной.

На рис. 3 изображены два трансляционно-неэквивалентных атома A и B в двумерном пространстве R_2 . Для трансляционной неэквивалентности достаточно одного атома, который не найдет себе пару при трансляции. Если все возможные па-

ры атомов в центральной элементарной ячейке окажутся трансляционно-эквивалентными, то они будут образовывать решетку Браве.

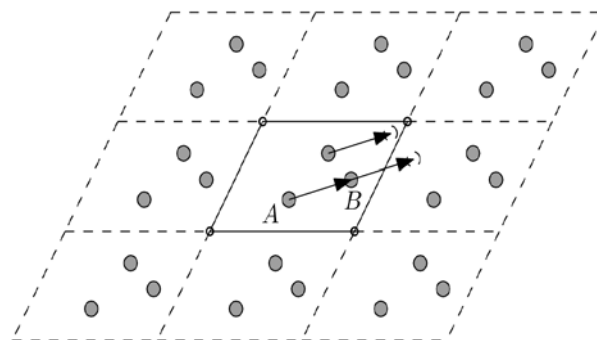


Рис. 3. Пример трансляционно-неэквивалентной пары атомов A и B

Оценим количество действий, которые будут произведены для выделения подрешеток при наличии N атомов одинакового сорта в элементарной ячейке. Всего в алгоритме будет проверено N^4 базисов. Проверка каждого базиса будет осуществлена за $\frac{1}{2} N(N-1) \cdot 27N$ элементарных операций сравнений координат атомов.

Действительно: всевозможных пар среди N атомов будет $\frac{1}{2} N(N-1)$, а проверка на то, что атом совместился с каким-либо из атомов в 27 элементарных ячейках при линейном поиске займет $27N$ операций. Итого получаем, что полный алгоритм выполнит $O(N) = \frac{27}{2} N^2 (N-1) N^4$ операций сравнения. Это грубая оценка, т.к. на самом деле при переборе будут выкинуты некоторые атомы, что существенно сократит количество сравнений при поиске. Получим, что $O(N) \sim N^7$, что растет при росте N гораздо медленнее, чем полный перебор, в котором присутствует член 2^N .

Таким образом, разработанный алгоритм позволяет эффективно выделять подрешетки Браве в кристаллах произвольной сложности.

Литература

1. Поплавной, А. С. Подрешетки в кристаллах. Кристаллография / А. С. Поплавной, А. В. Силинин. – 2005. – Т. 50. – № 5. – С. 782 – 787.
2. Поплавной, А. С. Кристаллы с подрешетками кубической сингонии и особенности их спектров элементарных возбуждений / А. С. Поплавной, А. В. Силинин // Известия вузов. Физика. – 2006. – Т. 49. – № 5. – С. 21 – 27.
3. Поплавной, А. С. Подрешетки в кристаллах низкосимметричных сингоний / А. С. Поплавной, А. В. Силинин // Известия вузов. Физика. – 2007. – Т. 50. – № 4. – С. 55 – 62.